



针对时-空中子输运方程的 算子推断方法及数据同化研究

张滕飞

上海交通大学

核能科学与核安全所



上海交通大学
SHANGHAI JIAO TONG UNIVERSITY

目 录

1

研究背景

2

算子推断方法

3

数据同化方法

4

研究结论



上海交通大学
SHANGHAI JIAO TONG UNIVERSITY

目 录

1

研究背景

2

算子推断方法

3

数据同化方法

4

研究结论

研究背景：堆芯中子学模拟



核反应堆堆芯中存在着复杂的物理过程，需要借助先进中子学模拟方法模拟中子与介质的相互作用，为反应堆设计与分析提供基础

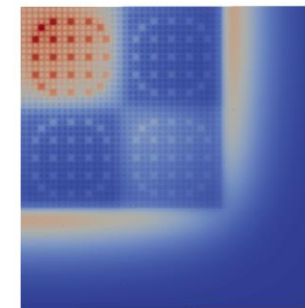
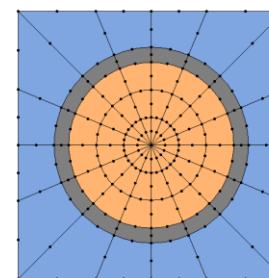
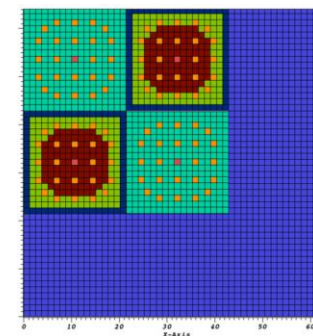
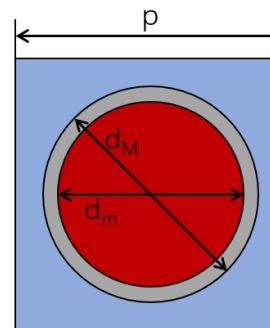
玻尔兹曼时空中子输运方程

$$\begin{aligned} \frac{1}{v(E)} \frac{d}{dt} \psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E, t) = & -\boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E, t) \\ & -\Sigma_t(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E, t) + q(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E, t) \\ & + \int dE' \int d\boldsymbol{\Omega}' \Sigma_s(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega} \cdot \boldsymbol{\Omega}', E' \rightarrow E) \psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}', E', t) \end{aligned}$$

输运方程的
变量离散方法

- r **空间**离散：有限元、特征线...
- Ω **角度**离散： S_N 方法、 P_N 方法
- t **时间**离散：隐式差分、准静态...
- E **能量**离散：多群

数值反应堆高保真模拟

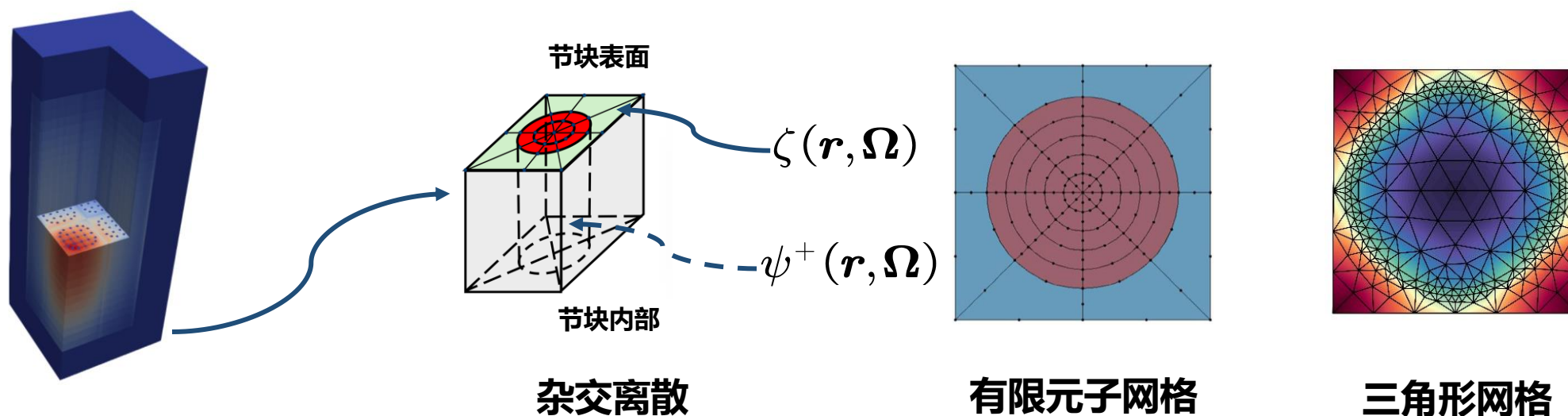


高精度、高分辨率、高置信度

研究背景：非均匀变分节块法



非均匀变分节块法 (HVNMM) 基于变分原理构造求解方程，采用杂交方法对节块内部与表面进行离散，可以采用**非结构三角形网格/有限元子网格**描述栅元几何与材料分布



展开阶数、h/p加密灵活 无横向积分，稳定性好

研究背景：模拟与测量数据同化

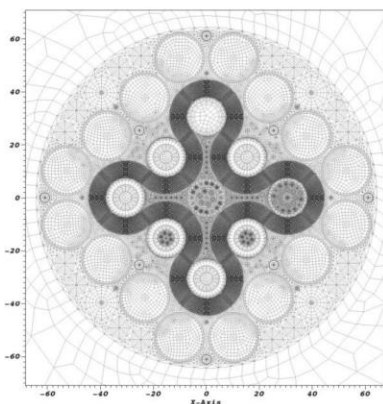


高分辨率数值模拟方法也存在多方面的挑战，可以结合实测数据通过**数据同化**获得堆芯真实状态的最优估计

数学模型与真实物理过程

纯数值模拟

模型误差
离散误差
参数不确定性
迭代收敛误差



数学模型



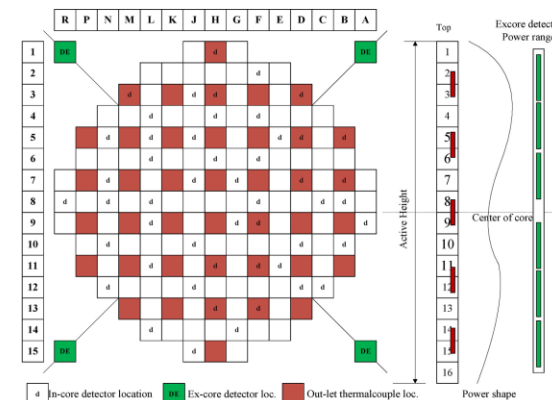
真实物理值

数据同化

模拟数据

+

测量数据



堆芯探测器



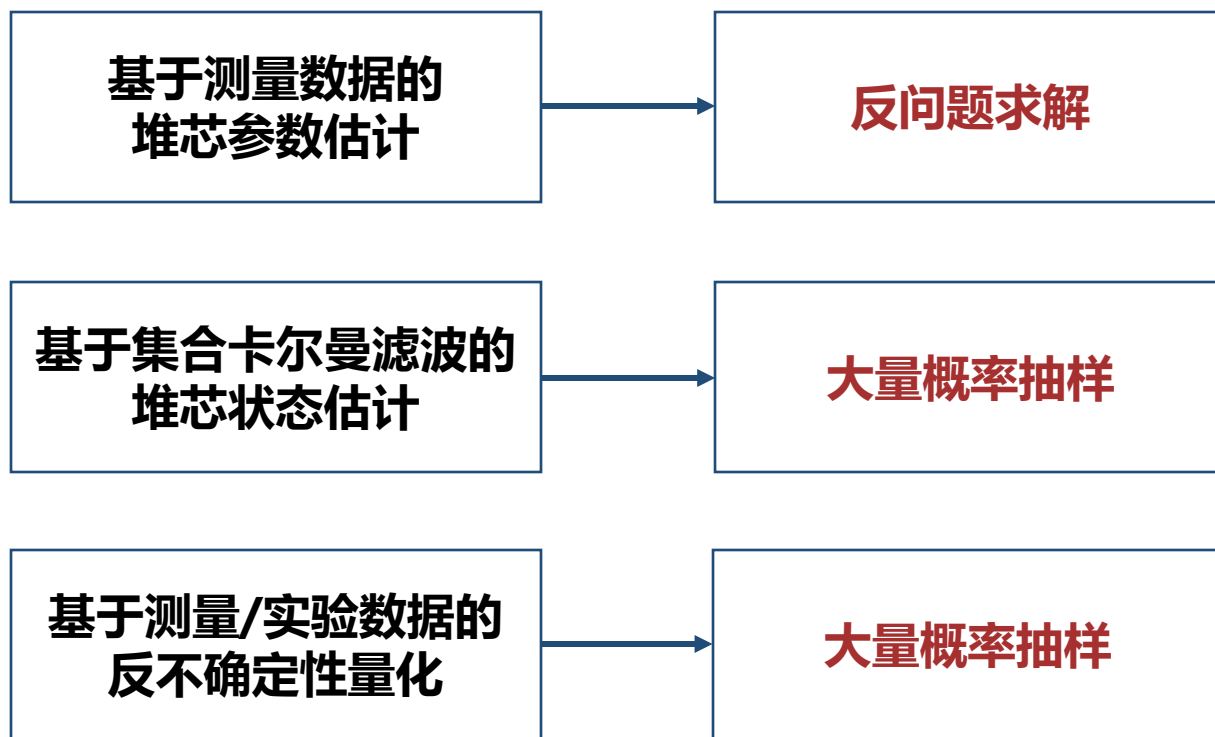
物理值最佳估计

研究背景：模拟与测量数据同化



数据同化方法能够结合多源测量值、数值模拟预测实现堆芯的**最优状态估计**、**功率重构**、**参数估计**等。而**简化模型**与**全阶模型**难以直接满足数据同化需求

数据同化典型应用场景



现有数值预测模型的局限性

简化模型无法满足**高分辨率数据同化**的需求

需要在参数空间内进行**大量正向计算**
全阶模型难以直接应用

研究背景与挑战：基于高分辨率数据的降阶模型



高分辨率数据具有**维度高**、**数据获取难度大**等特点，降阶预测模型应能够描述中子输运的**动力学特征**，同时拥有**低训练成本**与**高泛化能力**

基于高分辨率数据的降阶模型

高分辨率数据



提取低阶子空间特征



训练预测模型



快速预测计算

本征正交分解-伽辽金

降阶方法：

本征正交分解 (POD)

降阶动力学系统获取：

原方程伽辽金投影

局限性：

侵入式方法

动态模态分解

降阶方法：

POD

降阶动力学系统获取：

低阶特征值分解

局限性：

难以处理时变参数问题

神经网络类方法

降阶方法：

POD/自编码器

降阶动力学系统获取：

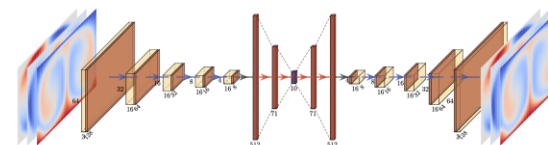
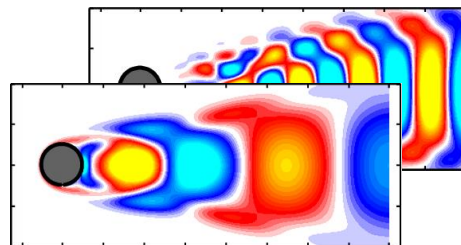
神经网络拟合

局限性：

训练成本高

可解释性弱

$$\left(\begin{array}{c} \phi_i, \frac{\partial u}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) - \\ \nabla \cdot \nu (\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T) + \nabla p \end{array} \right)_{L^2(\Omega)} = 0$$





上海交通大学
SHANGHAI JIAO TONG UNIVERSITY

目 录

1

研究背景

2

算子推断方法

3

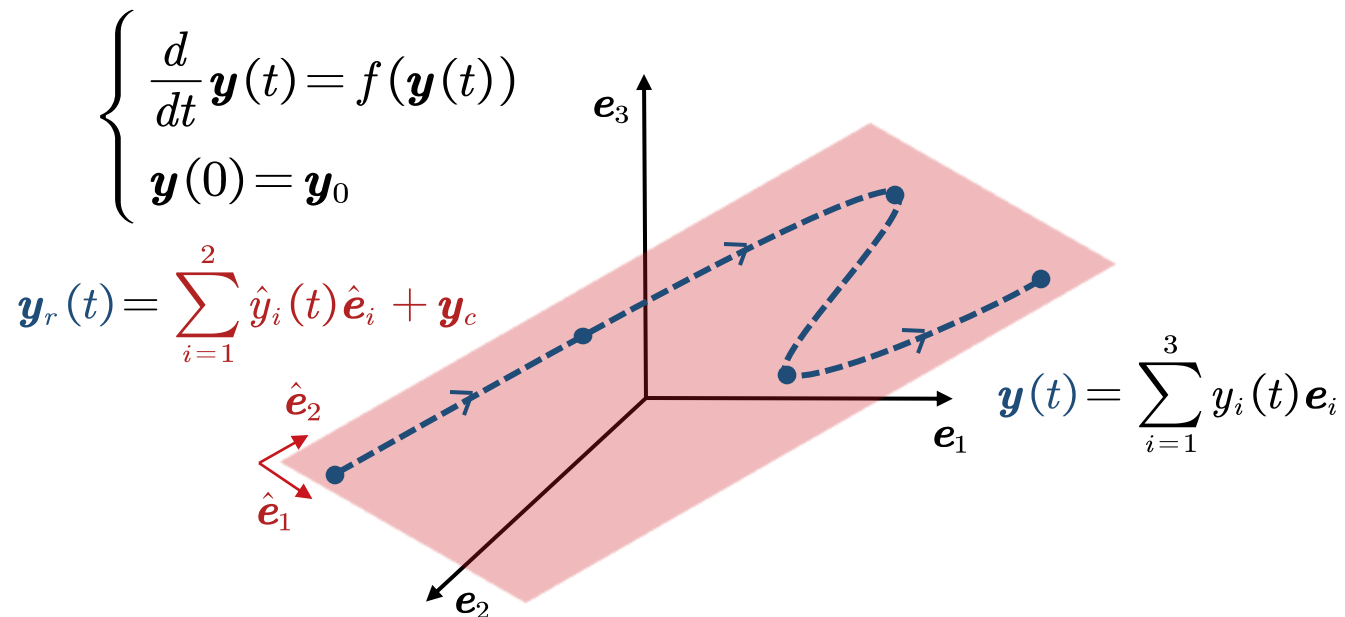
数据同化方法

4

研究结论

模型降阶的目标是寻找**低维空间**逼近**高维空间的子集**，并寻找**低维空间中的演化规律**

三维轨线与二维平面示意图



微分方程解的集合构成一条**三维空间中的轨线**，寻找**合适的二维平面/降阶基**，采用**二维坐标/降阶状态向量**描述轨线

动力系统

$$\frac{d}{dt} \mathbf{y}(t) = f(\mathbf{y}(t), \boldsymbol{\mu}), \mathbf{y}(t) \in X$$

全阶动力系统由**已知的物理方程**所描述， f 已知



降阶

$$\frac{d}{dt} \hat{\mathbf{y}}(t) = \hat{f}(\hat{\mathbf{y}}(t), \boldsymbol{\mu}), \hat{\mathbf{y}}(t) \in X_r$$

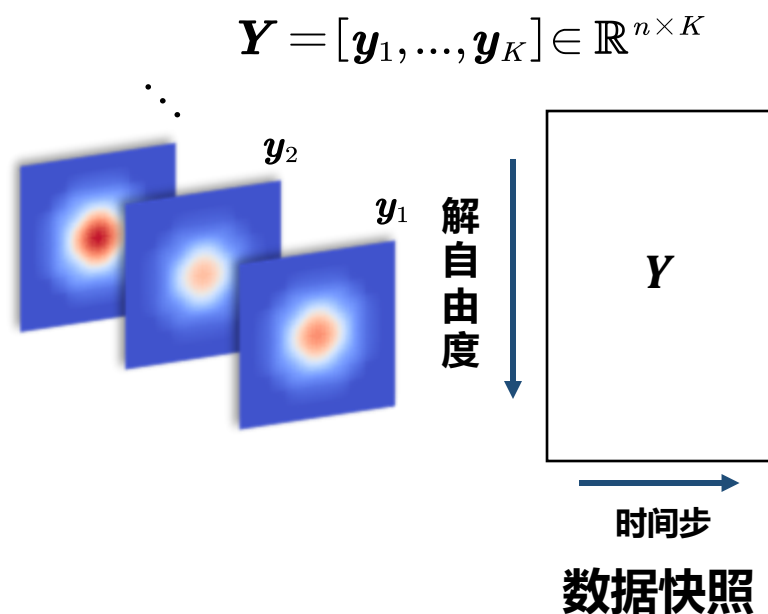
在低维空间中，时间演化规律是什么？如何找到**降阶动力系统** \hat{f} ？

算子推断模型降阶



求解全阶方程获取数据快照，使用奇异值分解从快照中提取降阶基与降阶状态向量，根据残余能量等判断标准，挑选出前 r 个基向量作为降阶基，构造出低维子空间

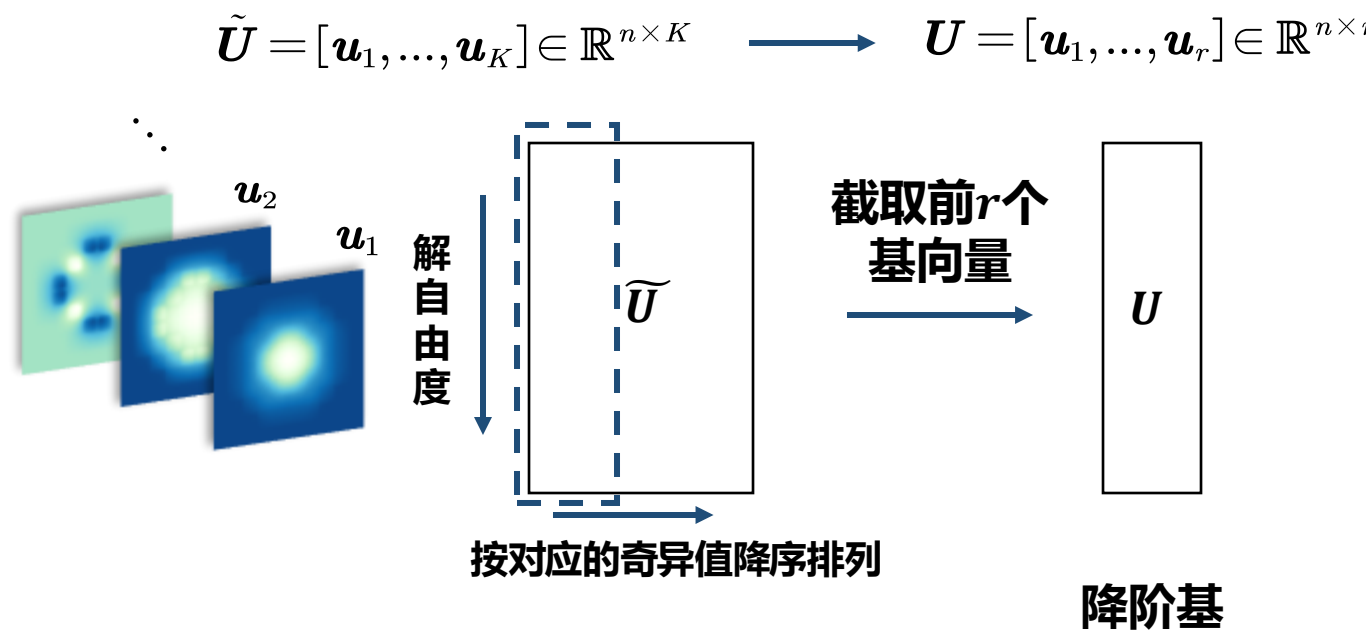
求解全阶方程获得数据快照



$$Y = \tilde{U} \tilde{S} \tilde{V}^T$$

奇异值分解

通过奇异值分解提取降阶基



重要关系式

原空间向低维流形投影

$$\hat{y} = U^T y$$

低维流形向原空间“反投影”

$$y \approx U \hat{y}$$

基于**原方程的形式**采用投影构造出降阶方程形式，利用降阶数据集拟合**降阶方程算子**。
该方法保留了全阶方程所描述的**物理规律**，并通过**非侵入式方法**拟合降阶模型

通过**投影**构造降阶动力系统

降阶关系 $\hat{\phi} = \mathbf{U}^T \phi$

全阶动力系统 (n维) $\frac{d}{dt} \phi = \mathbf{L}(\mu) \phi$ $\xrightarrow{\text{方程投影}}$ 降阶动力系统 (r维) $\frac{d}{dt} \hat{\phi} = \hat{\mathbf{L}}(\mu) \hat{\phi}$



构建目标函数
拟合降阶动力系统

$$\min_{\hat{\mathbf{L}}(\mu)} \left\{ \sum_{j=1}^{n_t} \left\| \hat{\mathbf{L}}(\mu) \hat{\phi}_j - \dot{\hat{\phi}}_j \right\|_2^2 + \Gamma(\hat{\mathbf{L}}(\mu)) \right\}$$

快速求解降阶动力系统
重构高保真物理场

$$\frac{d}{dt} \hat{\phi} = \hat{\mathbf{L}}(\mu) \hat{\phi}$$

方程求解

$$\phi \approx \mathbf{U} \hat{\phi}$$

全阶解重构

当目标函数仅考虑相邻时间步残差时，优化问题转化为**最小二乘**问题，实现降阶算子的**快速拟合**

构造最优化问题



$$\min_{\hat{A}_1, \hat{A}_2, \hat{f}} \sum_{i=1}^K \left\| \frac{d}{dt} \hat{\phi}_i - [\hat{A}_1 (\hat{\phi}_i \otimes \hat{\phi}_i) + \hat{A}_2 \hat{\phi}_i + \hat{f}] \right\|_2^2$$

转化为最小二乘问题



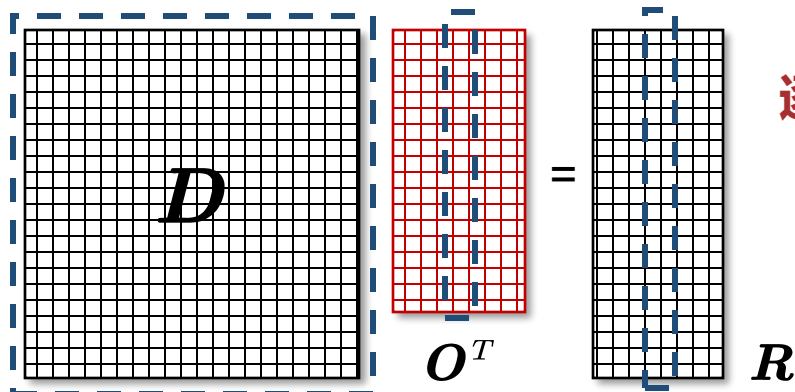
$$\min_O \|DO^T - R\|_F^2$$

$$D = \begin{bmatrix} \hat{\phi}_1 \otimes \hat{\phi}_1 & \cdots & \hat{\phi}_K \otimes \hat{\phi}_K \\ \hat{\phi}_1 & \cdots & \hat{\phi}_K \\ 1 & \cdots & 1 \end{bmatrix}^T \in \mathbb{R}^{K \times s} \quad \text{增广状态向量数据矩阵}$$

$$O = [\hat{A}_1, \hat{A}_2, \hat{f}] \in \mathbb{R}^{r \times s}$$

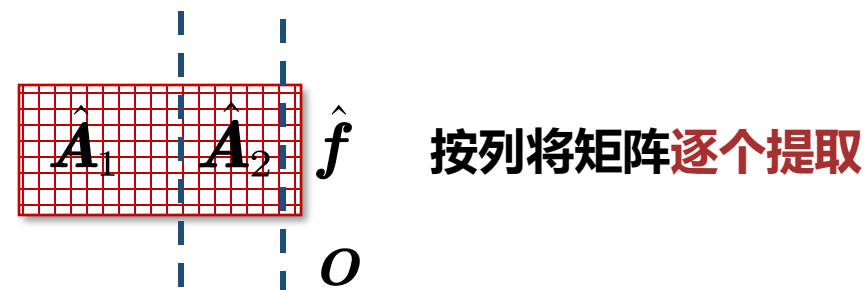
$$R = \begin{bmatrix} \frac{\hat{\phi}_1 - \hat{\phi}_0}{\delta t} & \cdots & \frac{\hat{\phi}_K - \hat{\phi}_{K-1}}{\delta t} \end{bmatrix}^T \in \mathbb{R}^{K \times r} \quad \text{时间差分数据矩阵}$$

求解与矩阵提取



逐个求解最小二乘问题，
获得 O^T 矩阵的每一列

$$\min_{o_i} \|D o_i - r_i\|_F^2$$



多物理场的控制方程中包含丰富的**先验信息**，通过引入先验信息决定降阶模型的结构，能够为降阶模型**引入明确的物理含义、降低模型的复杂度**

多物理方程中的先验信息

多物理控制方程

$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} \mathbf{y}_1 \\ \vdots \\ \mathbf{y}_N \end{bmatrix} = \mathcal{F}(\mathbf{y}_1 \cdots \mathbf{y}_N)$$

$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} \vdots \\ \vdots \\ \vdots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \text{[Sparse Matrix]} \\ \vdots \\ \text{[Sparse Matrix]} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \vdots \\ \vdots \\ \vdots \end{bmatrix}$$

稀疏结构

先验信息的提取



瞬发-缓发中子方程

$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} \hat{\psi} \\ \hat{C}_1 \\ \vdots \\ \hat{C}_{n_d} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{L} & \hat{L}_{11} & \cdots & \hat{L}_{1n_d} \\ \hat{F}_1 & \hat{A}_1 & & \\ \vdots & & \ddots & \\ \hat{F}_{n_d} & & & \hat{A}_{n_d} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\psi} \\ \hat{C}_1 \\ \vdots \\ \hat{C}_{n_d} \end{bmatrix}$$

先驱核之间无相互作用

瞬发中子-热传导方程

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{bmatrix} \hat{\psi} \\ \hat{T} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{A}_{11} & \hat{A}_{12} & \hat{A}_{13} & \cdots \\ \hat{A}_{21} & \hat{A}_{22} & & \cdots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\psi} \\ \hat{T} \\ \hat{T} \otimes \hat{\psi} \\ (\hat{T} \otimes \hat{T}) \otimes \hat{\psi} \\ \vdots \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \hat{b}_1 \\ \hat{b}_2 \end{bmatrix}$$

温度场没有向中子贡献源项

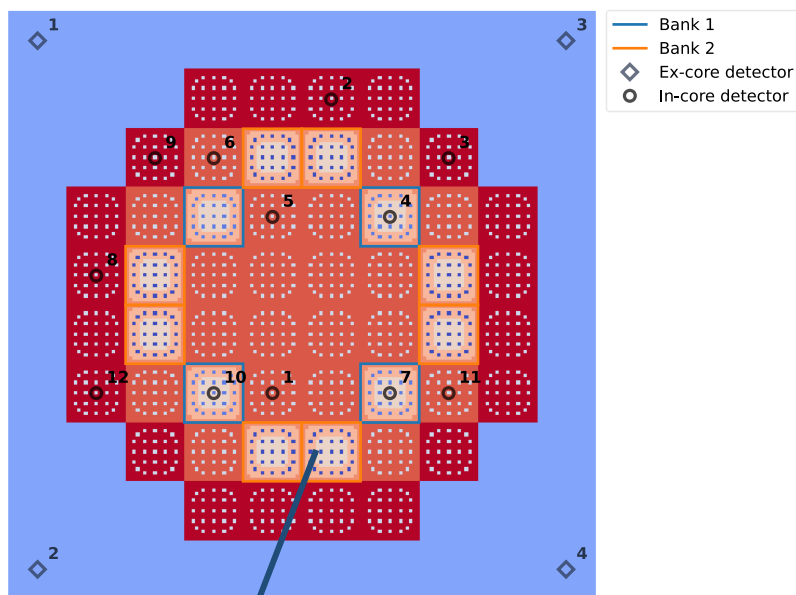
温度与中子的相互作用


方法验证：KAIST反应堆截面扰动问题



该问题模拟了二维堆芯的截面扰动，控制棒组件中**导向管区域中子截面**随控制棒参数 $\mu_i(t)$ 发生变化。利用**仿射参数分解与耦合约束**构造出降阶方程

问题堆芯布置



 $\Sigma(\mathbf{r}, \mu(t))$

导向管区域中子截面随时间发生变化

仿射参数分解与多物理约束确定模型结构

截面扰动形式

$$\Sigma(\mathbf{r}; \mu(t)) = \mu(t) \Sigma_{\text{CR}}(\mathbf{r}, t) + (1 - \mu(t)) \Sigma_{\text{MD}}(\mathbf{r}, t)$$

$$= \underbrace{\Sigma_{\text{MD}}(\mathbf{r}, t)}_{\text{原截面项}} + \underbrace{\mu(t) [\Sigma_{\text{CR}}(\mathbf{r}, t) - \Sigma_{\text{MD}}(\mathbf{r}, t)]}_{\text{扰动截面项}}$$

算子分解

$$L(\mu(t))\psi = \underbrace{L\psi}_{\text{原线性算子}} + \underbrace{\mu(t) N\psi}_{\text{扰动线性算子项}}$$

降阶方程形式

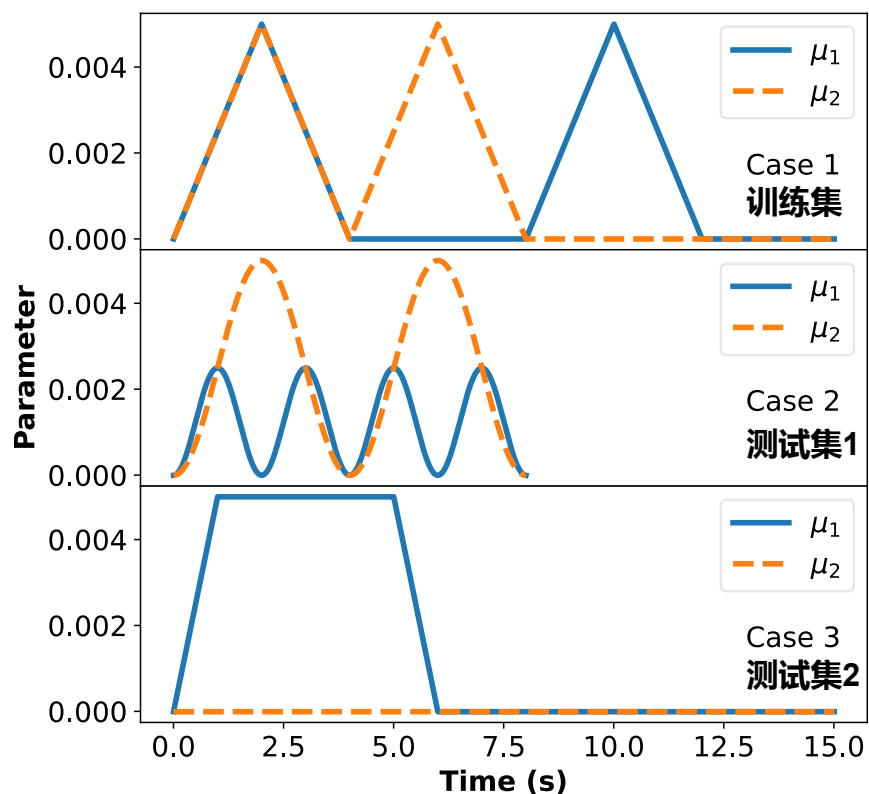
$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} \hat{\psi} \\ \hat{C}_1 \\ \vdots \\ \hat{C}_{n_d} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{L} & \hat{L}_{11} & \cdots & \hat{L}_{1n_d} \\ \hat{F}_1 & \hat{A}_{11} & & \\ \vdots & & \ddots & \\ \hat{F}_{n_d} & & & \hat{A}_{1n_d} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\psi} \\ \hat{C}_1 \\ \vdots \\ \hat{C}_{n_d} \end{bmatrix} + \sum_p \mu_p(t) \begin{bmatrix} \hat{N}^{(p)} \\ \\ \\ \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\psi} \\ \hat{C}_1 \\ \vdots \\ \hat{C}_{n_d} \end{bmatrix}$$

方法验证：KAIST反应堆截面扰动问题



采用线性扰动参数作为训练集，在**不同的参数扰动模式**下进行验证与测试。在测试集中功率分布的 L_2 误差小于0.33%，降阶模型求解速度的**加速比可达 10^7**

时变参数

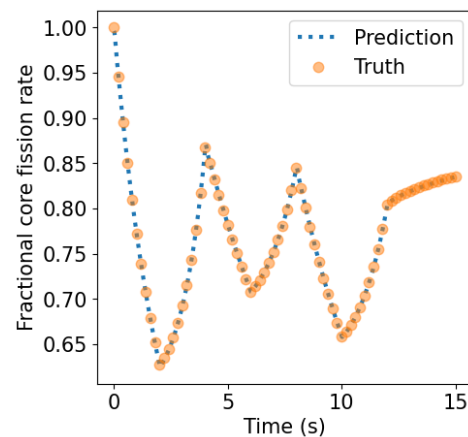


控制棒参数随时间变化

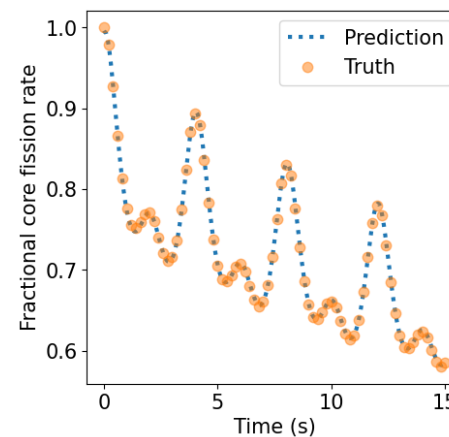
预测结果

问题	L_2 误差 (%)	最大误差 (%)
训练集	0.16	2.37
测试集1	0.33	2.08
测试集2	0.23	1.92

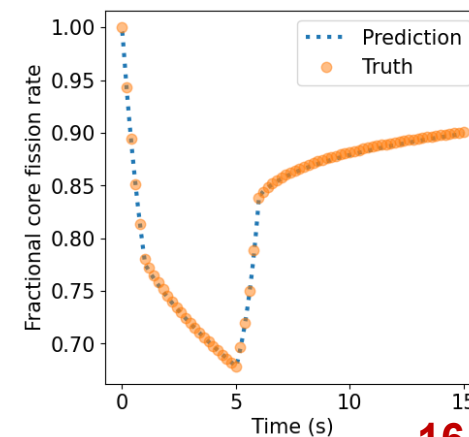
训练集



测试集1



测试集2

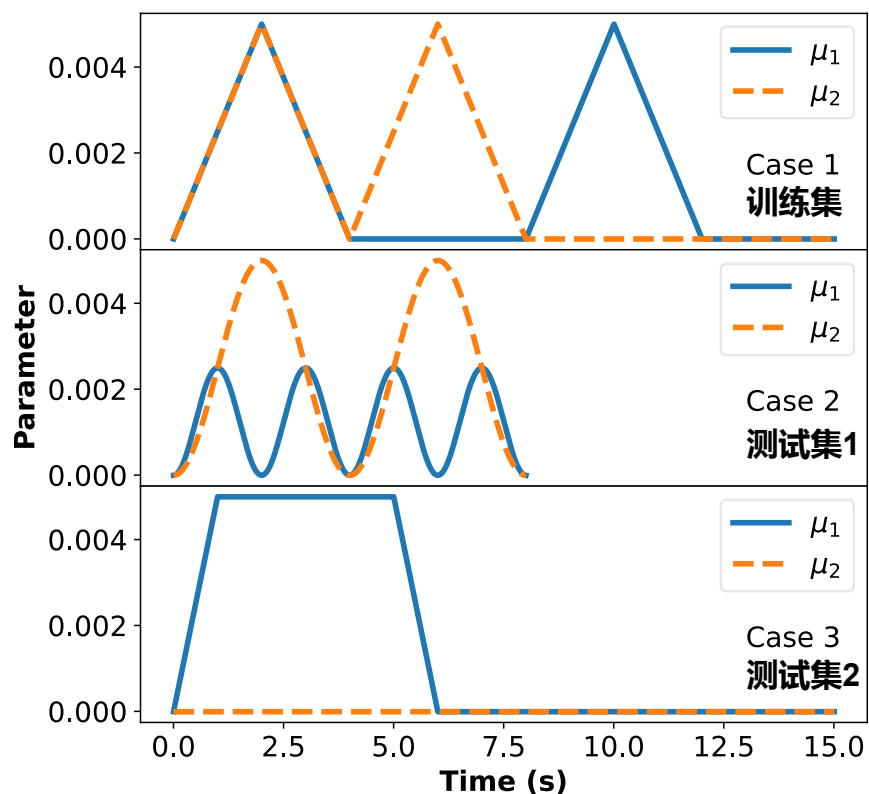


方法验证：KAIST反应堆截面扰动问题



采用线性扰动参数作为训练集，在不同的参数扰动模式下进行验证与测试。在测试集中功率分布的 L_2 误差小于0.33%，降阶模型求解速度的加速比可达 10^7

时变参数



控制棒参数随时间变化

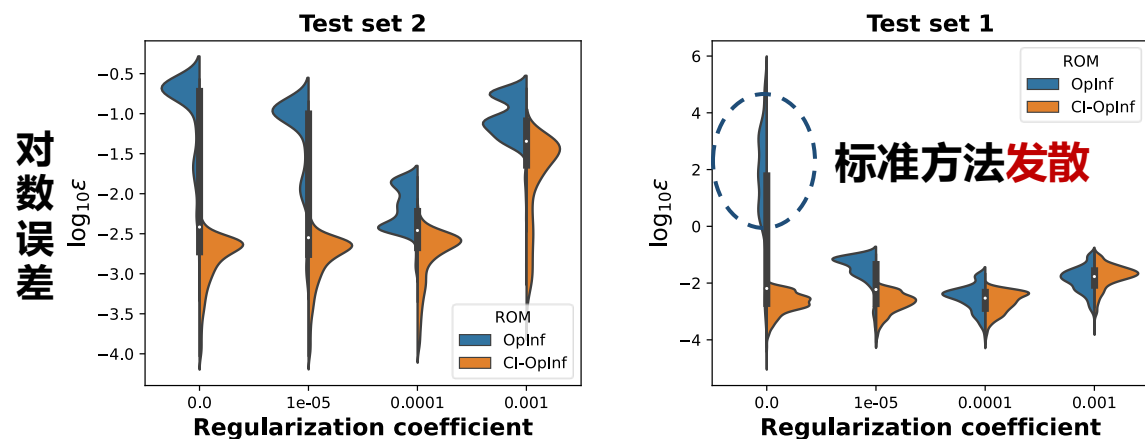
	降阶模型	全阶模型
自由度数目	11	23,582,400
求解时间 (每步)	9.1×10^{-9} 核时	0.17 核时
重构全场时间 (每步)	1.8×10^{-6} 核时	
训练集数据点数目	750	
训练时间	3.7×10^{-3} 核时	

方法验证：KAIST反应堆截面扰动问题



相比于传统算子推断，方程结构约束算子推断能够在**弱正则化**的情况下获得**更为准确、稳定的**预测结果；耦合约束算子推断在**训练集规模减小**的情况下仍能**保持预测精度**

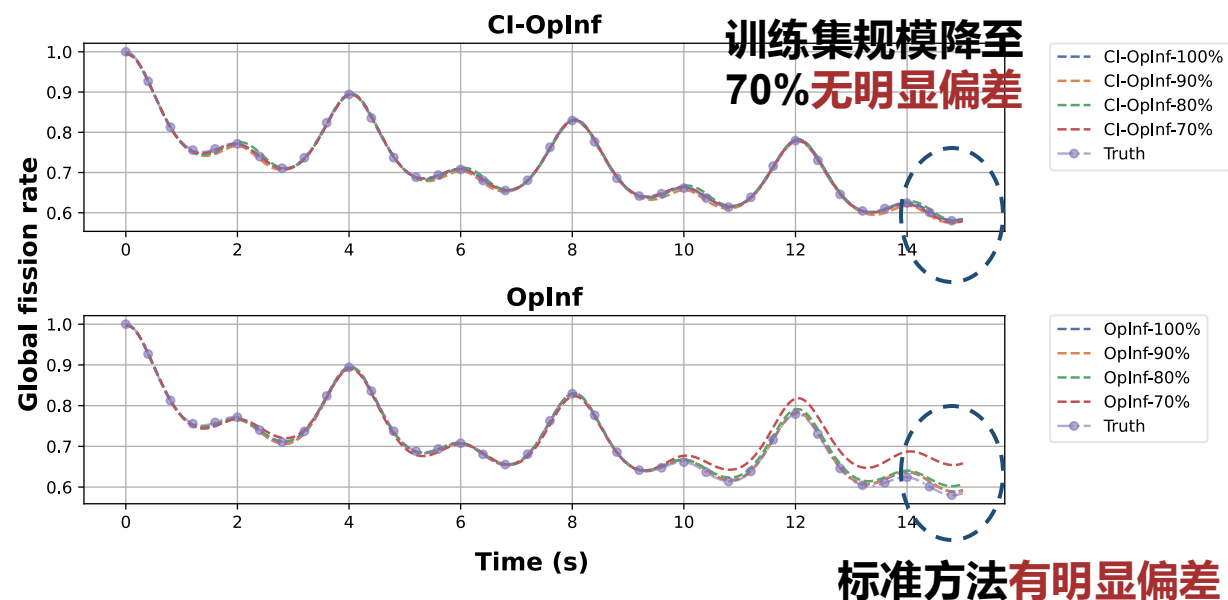
不同正则项系数下的预测误差对比



测试集1

测试集2

不同训练集规模下的预测结果对比



测试集2



上海交通大学
SHANGHAI JIAO TONG UNIVERSITY

目 录

1

研究背景

2

算子推断方法

3

数据同化方法

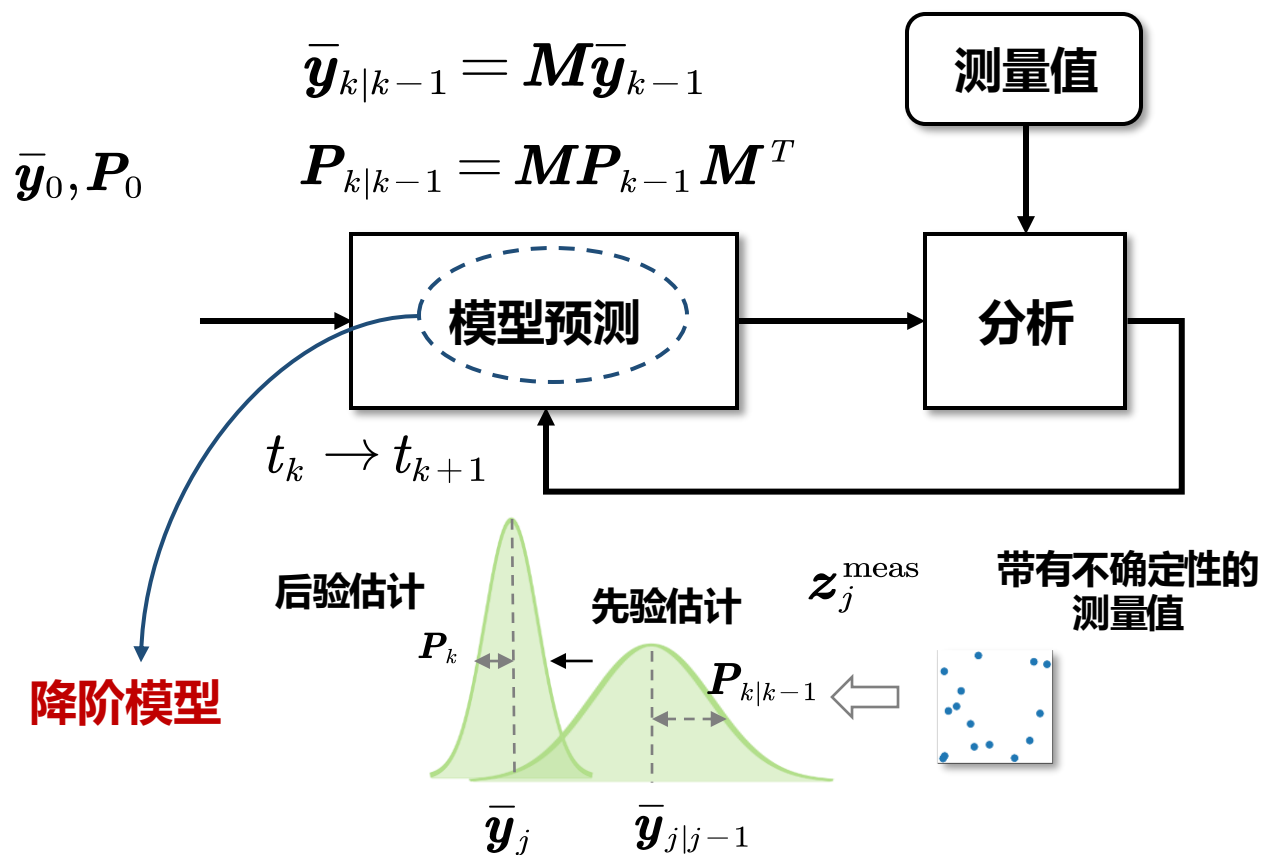
4

研究结论

卡尔曼滤波数据同化



结合预测模型与测量数据，求解优化问题，获得系统状态的**最优估计**，**量化并减少**系统状态中的**不确定性**；降阶预测模型使得最优化问题能够被**快速求解**

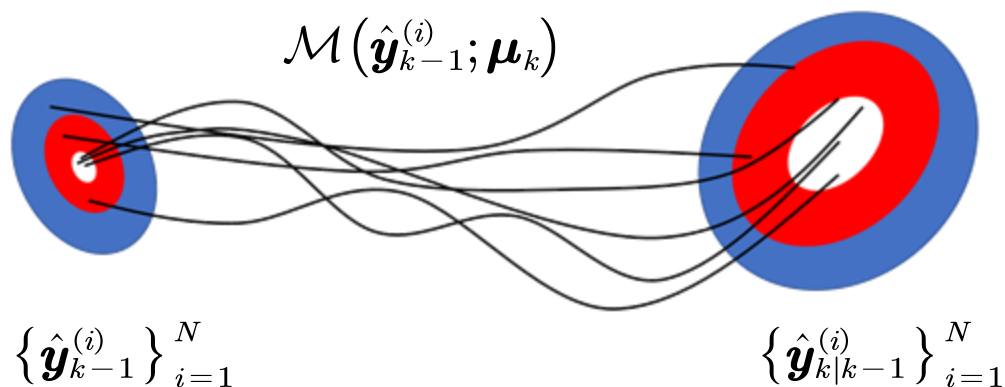


融合测量值获得状态向量的**最优后验估计**

集合卡尔曼滤波



采用样本集合的统计量描述降阶状态的概率分布；对状态转移函数 \mathcal{M} 与样本概率分布
无需引入近似或假设，可应用于非线性、非高斯分布的系统



从状态-观测交叉协方差与观测协方差定义增益矩阵

$$\mathbf{K}_k = \hat{\mathbf{P}}_{yz} \hat{\mathbf{P}}_{zz}^{-1} \begin{cases} \hat{\mathbf{P}}_{yz} = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (\hat{\mathbf{y}}_{k|k-1}^{(i)} - \bar{\mathbf{y}}_{k|k-1}) (\mathbf{z}_k^{(i)} - \bar{\mathbf{z}}_{k|k-1})^T \\ \hat{\mathbf{P}}_{zz} = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (\mathbf{z}_k^{(i)} - \bar{\mathbf{z}}_{k|k-1}) (\mathbf{z}_k^{(i)} - \bar{\mathbf{z}}_{k|k-1})^T \end{cases}$$

预测各样本新状态并计算先验概率



预测测量值与方差，并计算测量值偏差



计算卡尔曼增益



更新状态与后验概率

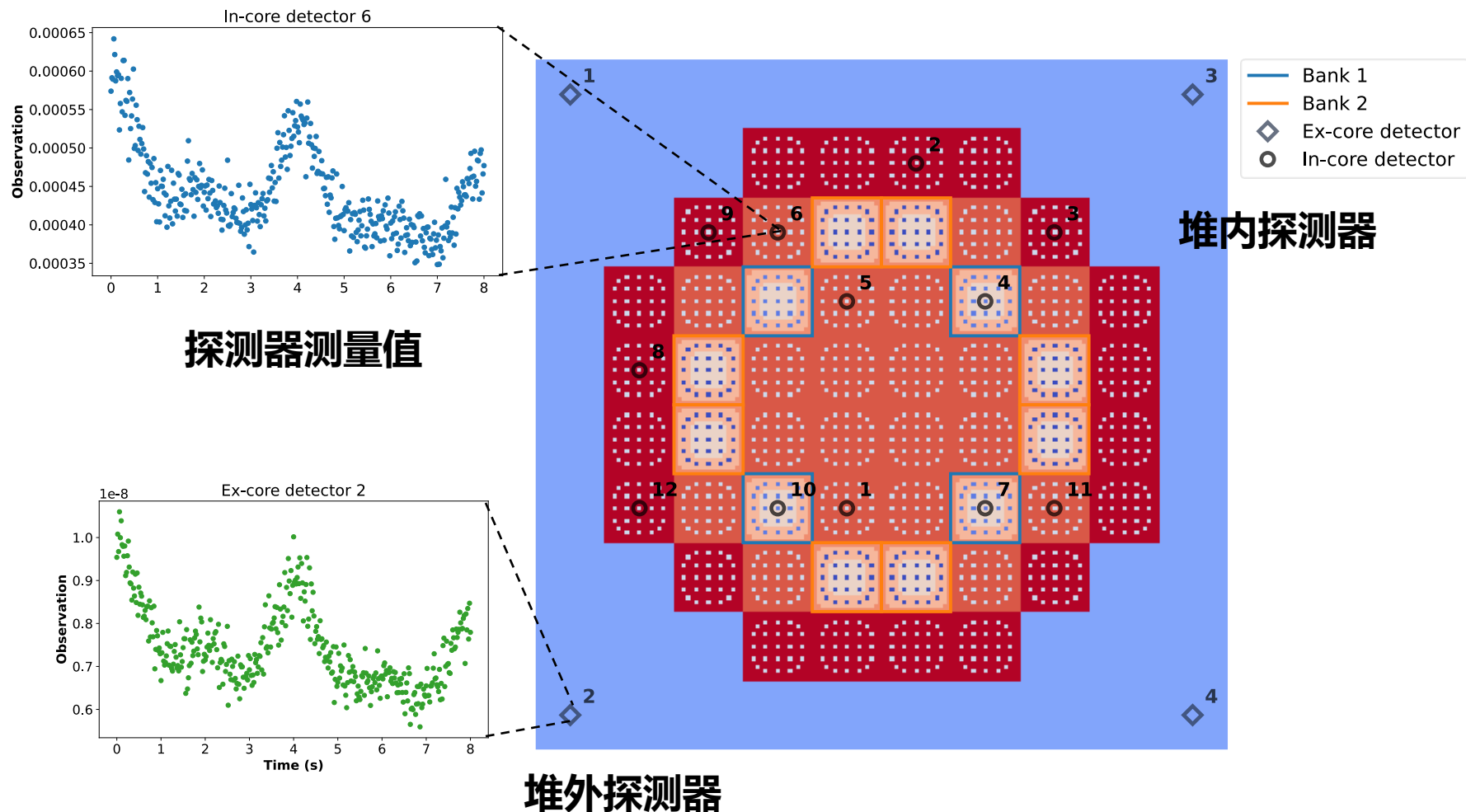
时间复杂度与样本数量和降阶状态维度相关

下一时刻
重复流程

数据同化方法的验证与分析



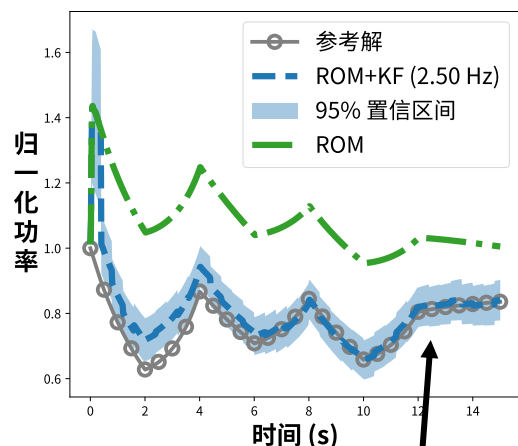
在初始条件存在偏差的情况下，通过线性卡尔曼滤波结合测量数据，**修正堆芯中的中子通量、功率、先驱核等高分辨率物理场**，并量化不确定性



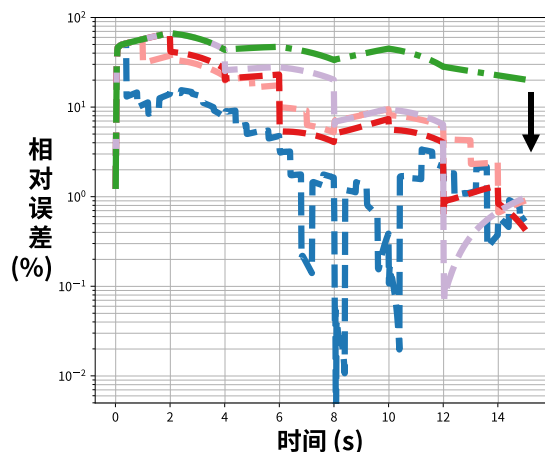
数据同化方法的验证与分析



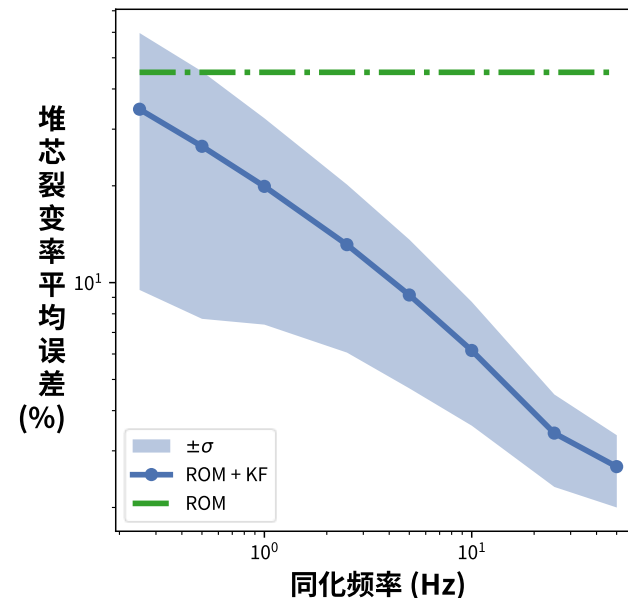
采用不同的随机初始条件与同化频率进行测试，直接模拟的平均误差为**46%**，同化频率为2.5 Hz时误差下降至**13%**



修正预测值收敛至真实值



降低预测误差



误差随着同化频率**0.5阶**的代数收敛

同化频率	误差
0 Hz	35%
2.5 Hz	13%
10 Hz	6%
50 Hz	3%

数据同化方法的验证与分析



当时变参数 $\mu(t)$ 存在不确定性或未知时，对参数引入**随机游走模型**，构造参数与系统状态的动力系统，通过集合卡尔曼滤波在修正物理场并对**时变参数进行推断**

参数动力学由**随机游走**描述

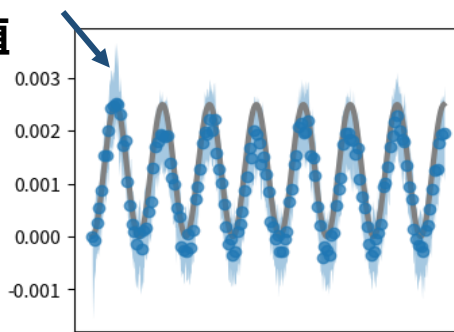
$$\hat{\mathbf{y}}_{k|k-1}^{(i)} = \mathcal{M}(\hat{\mathbf{y}}_{k-1}^{(i)}; \boldsymbol{\mu}_{k-1}^{(i)})$$

$$\boldsymbol{\mu}_{k|k-1}^{(i)} = \boldsymbol{\mu}_{k-1}^{(i)} + \delta_{\mu}^{(i)}$$

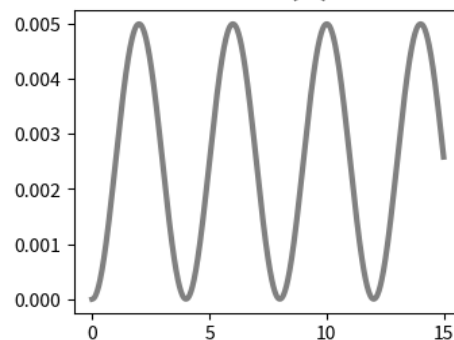
随机游走噪声

推断参数
趋近于真实值

子问题1



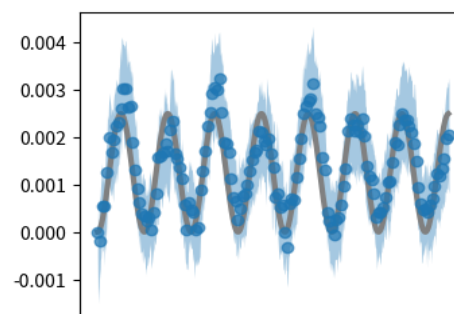
时间 (s)



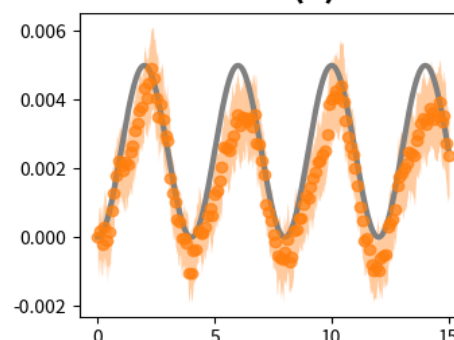
时间 (s)

参数1未知，参数2已知

子问题2



时间 (s)



时间 (s)

参数1未知，参数2未知

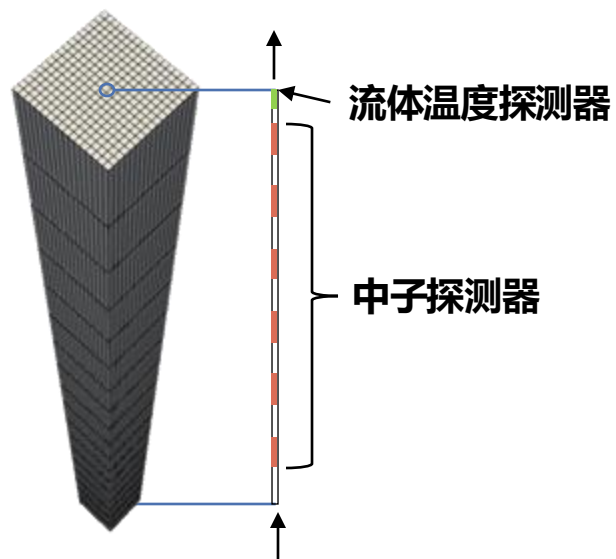
获得时变参数的**最优估计与不确定性**

数据同化方法的验证与分析

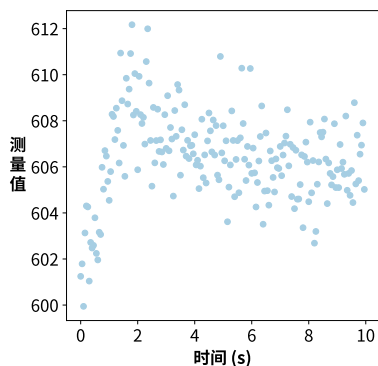


在入口流量扰动未知的情况下，通过随机游走与集合卡尔曼滤波结合中子、冷却剂温度测量数据，修正堆芯中的多物理场，并推断入口流量随时间的变化

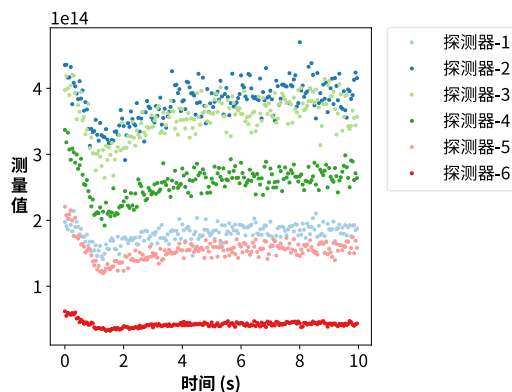
探测器布置



流体温度探测器测量值



中子探测器测量值



动力学模型

降阶预测模型

$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} \hat{\psi} \\ \hat{T}_s \\ \hat{T}_f \\ \hat{C}_1 \\ \vdots \\ \hat{C}_{n_d} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{O}_{1,1} & \hat{O}_{1,2} & \hat{O}_{1,3} & & & \hat{O}_{1,71} & \cdots & \hat{O}_{1,7n_d} \\ & \hat{O}_{2,1} & & \hat{O}_{2,4} & \hat{O}_{2,5} & & & \\ & & & \hat{O}_{3,4} & \hat{O}_{3,5} & \hat{O}_{3,6} & & \\ & \hat{O}_{41,1} & & & & & \hat{O}_{41,71} & \\ \vdots & \vdots & & & & & \ddots & \\ \hat{O}_{4n_d,1} & & & & & & \hat{O}_{4n_d,71} & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\psi} \\ \hat{T}_s^{(0)} \hat{\psi} \\ \hat{T}_f^{(0)} \hat{\psi} \\ \hat{T}_s \\ \hat{T}_f \\ \mu \hat{T}_f \\ \hat{C}_1 \\ \vdots \\ \hat{C}_{n_d} \\ 1 \end{bmatrix}$$

参数（入口流量扰动）随机游走模型

$$\frac{d}{dt} \mu = 0$$

降阶观测模型

$$\begin{bmatrix} z_{\psi} \\ z_T \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} B_{\psi} U_{\psi} & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & B_{T_f} U_{T_f} & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\psi} \\ \hat{T}_s \\ \hat{T}_f \\ \hat{C}_1 \\ \vdots \\ \hat{C}_{n_d} \end{bmatrix}$$

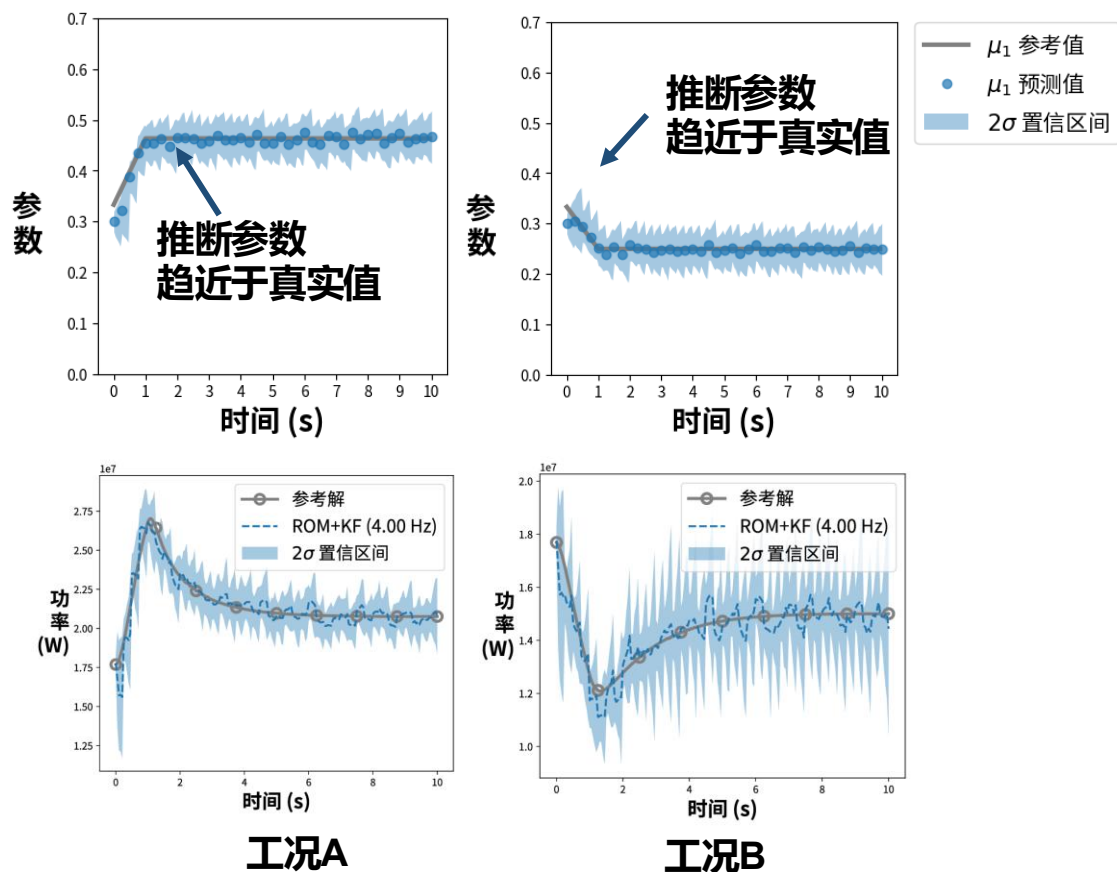
数据同化方法的验证与分析



在同化频率为4Hz时，该方法能够以**4.86%**的平均误差跟踪**入口流量的未知变化**，功率平均误差为**4.41%**，慢化剂出口温度平均误差分别为**0.27 K**

数据同化结果

入口流量推断与功率预测



同化频率对误差的影响

同化频率 (Hz)	功率误差(%)	燃料最高温误差(K)	出口最高温误差(K)
2.0	6.16	24.45	0.44
4.0	4.41	7.83	0.27
10.0	3.04	7.66	0.23
20.0	2.73	6.26	0.19



上海交通大学
SHANGHAI JIAO TONG UNIVERSITY

目 录

1

研究背景

2

算子推断方法

3

数据同化方法

4

研究结论

算子推断作为**数据-物理驱动**的降阶动力系统学习方法，具有**易用、可拓展性与可解释性强**的特点

本工作探索了算子推断在时-空输运方程中的应用：

- 裂变率预测上的相对误差均低于1%，加速比达到高达 10^7 ，能够开展超实时预测
- 展示了相关的降阶模型在**数据同化领域**的应用前景；在初值存在误差的情况下，结合测量值使堆芯功率预测误差控制在5%以下



谢谢！ Q & A

张滕飞 副教授
zhangtengfei@sjtu.edu.cn
上海交通大学

饮水思源 爱国荣校